

Analyse multi-échelles des déformations/contraintes sur des assemblages électroniques complexes - Application à la technologie flip-chip

A.-L. LEBAUDY^{a,b}, R. PESCI^a

- a. ENSAM-Arts et Métiers ParisTech, 4 rue Augustin Fresnel, 57078 Metz Cedex 3 France, annelaure.lebaudy@gmail.com, raphael.pesci@ensam.eu
b. CEATECH, Metz Technopole, 5 Rue Marconi, 57070 Metz France

Résumé :

Dans l'industrie de la microélectronique, l'intégration 3D a émergé afin de contourner les limitations de la technologie planaire. La diffraction des rayons X est un outil performant pour l'analyse des déformations et des contraintes à différentes échelles, permettant la réalisation de cartographie au sein d'assemblages électroniques complexes. Dans cette étude, la puce et le substrat sur lequel la puce est brasée ont été analysés afin de quantifier les champs de contraintes en présence et liés à la géométrie de l'assemblage. Le travail proposé ici décrit les moyens employés pour réaliser les différentes analyses sur des monocristaux utilisés dans des structures d'intégration 3D ; les résultats sont ensuite comparés à des simulations numériques par éléments finis et sont discutés.

Abstract:

In the microelectronics industry, 3D integration has emerged to skirt the limitations of planar technology. X-ray diffraction is a powerful tool for strain and stress analysis at different scales, enabling mapping in complex electronic assemblies. In this study, the chip and the substrate on which the chip is soldered were analyzed in order to quantify the stress fields present in relation to the geometry of the assembly. The work here proposed describes the means used to perform the various analyses on single crystals used in 3D integration structures; the results are then compared to finite element numerical simulations and are discussed.

Mots clefs : fiabilité, contraintes résiduelles, diffraction des rayons X, microdiffraction

1 Introduction

Afin de faire face à la concurrence internationale et de se positionner avantageusement sur le marché, les fabricants de composants électroniques développent continuellement de nouveaux dispositifs plus performants et compacts. L'intégration 3D a notamment émergé afin de contourner les limitations de la technologie planaire. Dans cette configuration, différentes puces sont interconnectées les unes avec les

autres et empilées verticalement. Ces architectures peuvent s'avérer problématiques en raison de la densification des interconnexions et de la présence de matériaux hétérogènes. En effet, les variations de température induites par le procédé de fabrication et le cycle de vie génèrent des différences de dilatation thermique introduisant des contraintes internes entre chaque couche (puce, brasure, substrat) dégradant les performances et la fiabilité de l'assemblage. C'est pourquoi il est essentiel aujourd'hui pour l'industrie électronique de pouvoir quantifier les champs de contraintes dans les composants à différentes étapes de l'assemblage et ce pour différentes échelles d'observation. Dans ce but, la modélisation éléments finis a largement été employée afin de pouvoir prédire l'apparition de déformations/contraintes sous différents types de chargement. Cependant, la complexité de la géométrie des assemblages électroniques est devenue telle que de nombreuses hypothèses sont nécessaires afin d'obtenir des temps de calcul acceptables. De même, des connaissances insuffisantes dans le domaine du comportement des matériaux constituant la structure limitent la précision des résultats obtenus. Dans cette étude, l'analyse complète d'un assemblage flip-chip à l'aide de différentes méthodes expérimentales d'analyse de contraintes a été réalisée. Parmi ces techniques, la diffraction des rayons X de laboratoire (DRX), la diffraction Kossel et la microdiffraction Laue (essais réalisés sur la ligne BM32 à l'ESRF de Grenoble) ont été exploitées. Le travail effectué est principalement axé sur l'utilisation d'une technique d'analyse de contraintes par DRX appelée « méthode monocristalline », appliquée à une architecture multicouches composée de plusieurs monocristaux. Les résultats ont été mis en lien avec les valeurs numériques obtenues avec un modèle éléments finis.

2 Expérimentations

2.1 Structure étudiée

L'assemblage considéré dans cette étude est constitué de 3 couches : une puce en CdHgTe, une matrice de billes d'indium/epoxy constituant la zone d'interconnexion et un substrat en silicium (figure 1). Véhicule test pour cette étude, ce type d'assemblage est utilisé dans le cadre de la détection infrarouge. Le but est de déterminer le niveau de contrainte généré par les étapes de fabrication de l'assemblage dont l'une des étapes clés est le brasage de la puce sur son substrat par microbilles d'indium. Les matériaux de cette structure ayant des coefficients de dilatation très différents, les variations de température imposées durant le procédé de fabrication (de 473 K à 293 K) génèrent des champs déformations/contraintes répartis inégalement dans l'assemblage. Ce phénomène est à l'origine de modes de défaillance caractéristiques : rupture au niveau des billes d'interconnexion, clivage de la puce en CdHgTe. Ces ruptures prématurées sont également observées lors de la mise en service de l'assemblage électronique fonctionnant à 77 K. Il est ainsi présagé que les champs de contraintes sont amplifiés dans certaines régions de l'assemblage. Afin de lier la géométrie de la structure et l'apparition des déformations engendrant ces modes de défaillance, et pour essayer de les anticiper, il est capital de pouvoir estimer les valeurs des contraintes générées lors de la fabrication. La méthode dite « des $\sin^2 \psi$ » est la méthode standard de diffraction des rayons X utilisée dans le cadre de l'analyse des matériaux polycristallins. Cette méthode est cependant inadéquate pour l'étude des matériaux monocristallins ou texturés du fait de l'existence d'une orientation cristallographique préférentielle. La puce en CdHgTe et le substrat en silicium étant deux monocristaux, une autre approche a dû être envisagée. Une procédure appropriée a été développée par Imura en 1960 [1], puis améliorée par Ortner en introduisant un tenseur métrique dans la procédure de calcul liant les paramètres de maille calculés au tenseur de déformation [2]. Cette méthode a par conséquent été mise en place et optimisée dans le cadre de cette étude, afin de cartographier l'état de contrainte présent dans la puce et le substrat.

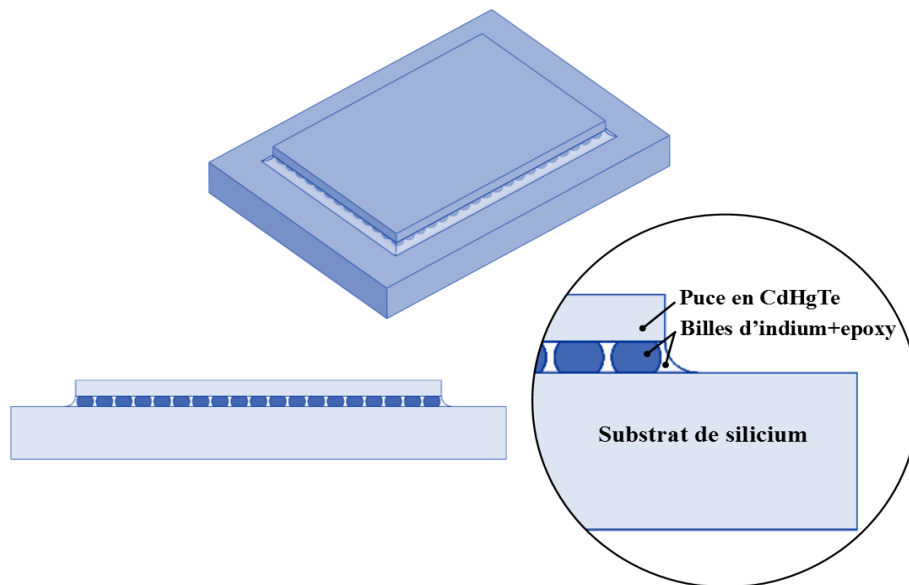


Figure 1 Architecture de l'assemblage électronique étudié

2.2 Technique utilisée

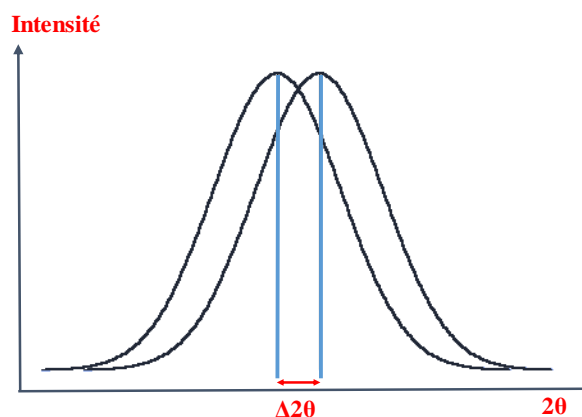
La mesure de déformation au sein d'un matériau cristallin par diffraction des rayons X est basée sur la variation de l'angle de diffraction θ du rayonnement induite par une variation des distances interatomiques d . Ces 2 grandeurs sont liées par la loi de Bragg régissant les conditions de diffraction :

$$\lambda = 2 \cdot d \cdot \sin[(\theta)]$$

avec λ la longueur d'onde du rayonnement utilisé. Dans un diffractomètre de laboratoire, l'échantillon est bombardé par un faisceau de rayons X monochromatiques et parallèles produit à l'aide d'une anticathode. Suivant la configuration du diffractomètre, le dispositif permet de placer le montage en condition de diffraction. Un détecteur ou compteur permet de mesurer l'intensité de la partie du faisceau diffracté par le matériau en effectuant un balayage en 2θ . La mesure du déplacement $\Delta 2\theta$ entre le pic de diffraction obtenu et un pic de référence permet de déterminer la déformation ε des plans interréticulaires étudiés (figure 2) :

$$\varepsilon = \frac{d - d_0}{d} = -\frac{1}{2} \cdot \cotan(\theta)$$

avec d_0 la distance interatomique connue du matériau non déformé.

Figure 2 Déplacement d'un pic sous contrainte - Principe de la mesure de $\Delta 2\theta$

Les contraintes associées sont ensuite déterminées à l'aide des constantes élastiques du matériau considéré.

Les mesures ont été réalisées sur un diffractomètre 4 cercles Seifert 3003PTS équipé d'un collimateur de 0,5mm de diamètre, d'un détecteur ponctuel, un monochromateur arrière et de fentes de Sollers limitant la déviation axiale du faisceau diffracté. Un tube de fer a été utilisé pour l'analyse de la puce en CdHgTe. La résolution spatiale de la technique est directement reliée à la taille du faisceau (0,5mm) et à la pénétration des rayons X utilisés dans la matière (dépendante du matériau étudié).

3 étapes sont nécessaires pour mettre en place la méthode d'analyse de contrainte par DRX sur un monocristal. La première étape consiste à connaître l'orientation du cristal étudié dans l'espace. Dans ce but, une figure de pôles est réalisée en considérant de préférence la famille de plans {hkl} ayant l'intensité de diffraction la plus élevée. Pour les structures cubiques diamants (cas du CdHgTe et du silicium), les plans denses {111} sont choisis. Ensuite, la position de chaque plan (hkl) peut être déterminée par projection stéréographique. Chacune de ces positions correspond à une combinaison des angles φ (azimut) et ψ (tilt) permettant de placer le plan (hkl) en condition de diffraction pour l'acquisition du pic correspondant. Pour minimiser l'erreur sur la détermination de l'angle 2θ , les familles de plans {hkl} choisies sont celles avec la plus grande multiplicité et l'angle 2θ associé de préférence proche de 150° (choix de la longueur d'ondes en conséquence). Dans cette étude, la famille de plans {533} a été sélectionnée. La détermination des angles de diffraction 2θ de chaque pic associé à un plan (hkl) permet de calculer directement les distances interréticulaires d_{hkl} avec la loi de Bragg. La détermination d'au moins 6 distances interréticulaires est nécessaire afin de mener à bien le calcul décrit ci-après permettant le traitement des données. Les composantes du tenseur métrique associé au cristal déformé et g^{ij} dans l'espace réciproque peuvent être calculées par régression multilinéaire du système d'équations défini par la relation :

$$d_{hkl}^{-2} = g^{ij} \cdot a_i \cdot a_j$$

avec d_{hkl} la distance interréticulaire de la famille de plans {hkl} et les a_i ($i = 1$ à 3) les coordonnées du nœud h k l du réseau réciproque. A noter que ce système ne peut être résolu que si les équations du système sont indépendantes les unes des autres. Le tenseur des déformations du cristal pour une maille cubique se déduit directement du tenseur métrique du cristal déformé :

$$\varepsilon_{ij} = \frac{\delta_{ij} - a^2 g^{ij}}{2}$$

avec a le paramètre de maille et δ_{ij} le symbole de Kronecker tel que $\delta_{ij}=1$ lorsque $i = j$ et $\delta_{ij}=0$ lorsque $i \neq j$.

Les valeurs de contrainte sont ensuite calculées grâce à la loi de Hooke généralisée les contrainte σ_{ij} aux déformations ε_{kl} :

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}$$

avec C_{ijkl} le tenseur des constantes élastiques du cristal. Le calcul de la contrainte nécessite de connaître avec précision le paramètre de maille du matériau non contraint.

Afin d'introduire le moins d'erreurs possibles dans le calcul, une détermination directe de ce paramètre est possible en posant $\sigma_{33}=0$. Cette hypothèse se justifie par la faible profondeur de pénétration des rayons X (environ quelques micromètres) dans la matière.

2.3 Résultats et discussion

Des tenseurs de contrainte obtenus dans la puce en CdHgTe par la méthode décrite plus haut sont présentés à la figure 3.

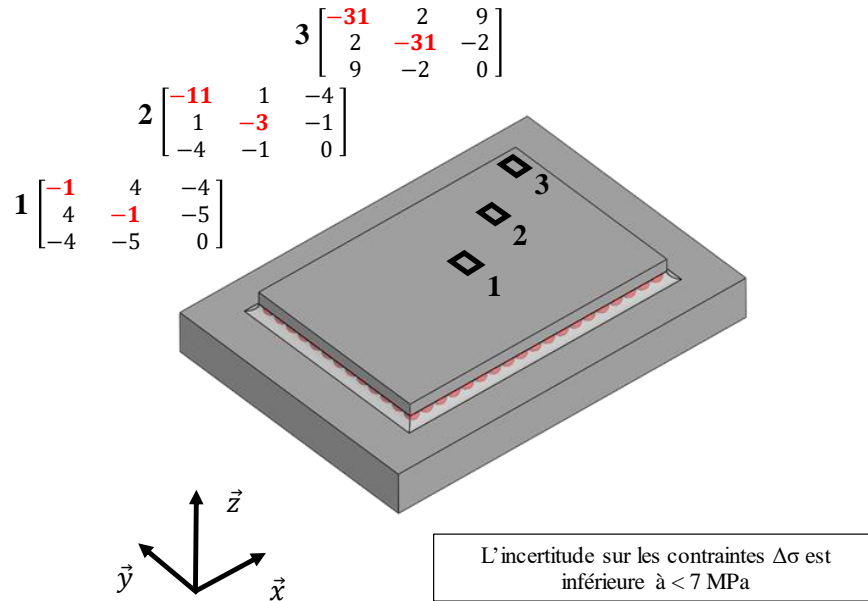


Figure 3 Tenseurs de contrainte déterminés dans le CdHgTe à trois endroits distincts de l'assemblage

Ces valeurs montrent que le bord de la puce est plus contraint par rapport à son centre. On note en particulier un état de compression biaxiale du CdHgTe en périphérie. Industriellement, il est régulièrement constaté que le clivage de la puce s'amorce en bordure de puce, d'où l'intérêt d'analyser cette zone et de comparer avec le niveau de contrainte obtenu à celui au centre, considéré comme référence. Au-delà des 3 tenseurs de contraintes obtenus, des profils ont été réalisés dans ces zones afin de rendre compte de l'évolution de la contrainte en fonction de la géométrie. La figure 4 montre l'évolution des contraintes σ_{xx} et σ_{yy} le long d'une diagonale de la puce en CdHgTe. Des valeurs plus élevées en bordure ainsi qu'une augmentation significative des valeurs de contrainte depuis le centre de la puce sont de nouveau mises en évidence.

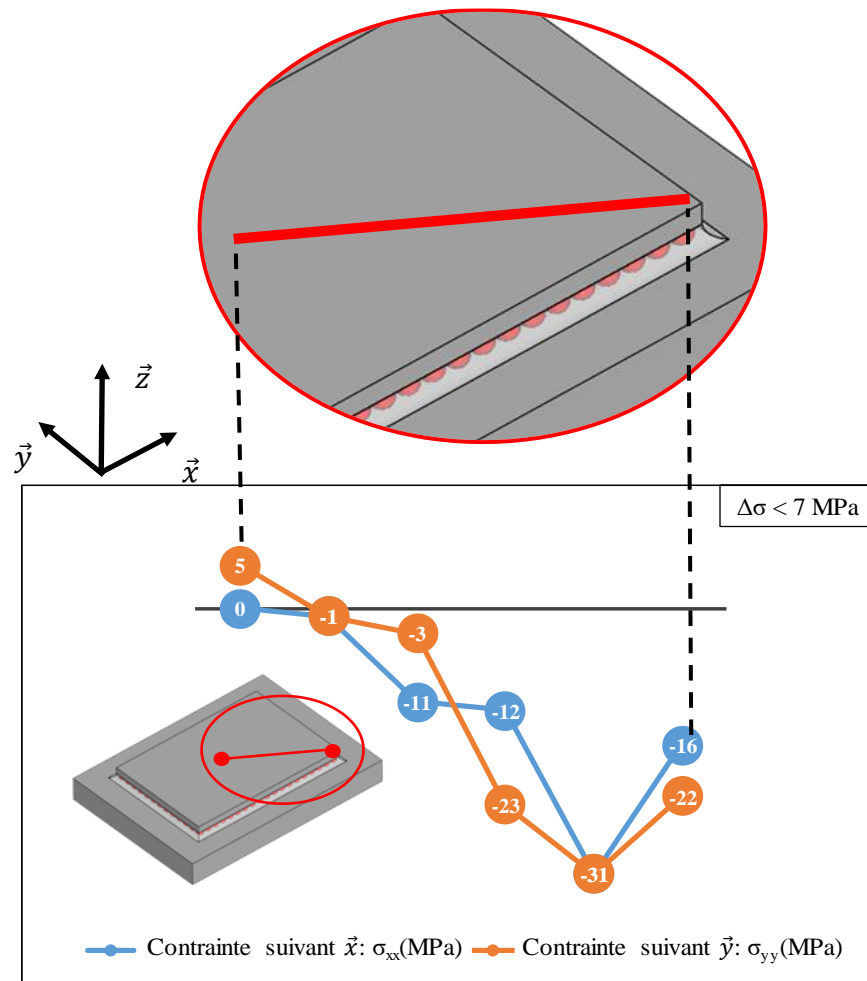


Figure 4 Evolution des contraintes suivant une diagonale de la puce

La modélisation par la méthode des éléments finis d'un assemblage 3D développée par Kpobie [3] a été utilisée pour comparaison avec les valeurs obtenues en DRX. Afin de réduire le temps de calcul et le nombre d'éléments du maillage, la couche d'interconnexion constituée de billes d'indium noyées dans une matrice d'époxy a été remplacée par un Matériau Homogène Equivalent (MHE). Les propriétés thermomécaniques du MHE ont été déterminées à l'aide de modèles micromécaniques d'homogénéisation et en particulier celui de Mori-Tanaka. La loi de comportement thermomécanique du MHE a été implémentée dans une sous-routine utilisateur UMAT sous Abaqus. Le modèle est constitué d'un plan de symétrie : seulement une moitié de l'assemblage est donc considéré. Le volume est constitué de 1096243 éléments hexagonaux et 1148722 nœuds. Dans cette simulation, des chargements thermiques ont été appliqués en lien avec ceux se succédant lors du processus de fabrication de la structure étudiée. Des gradients thermiques allant de 473 K à 293 K ont ainsi été imposés, simulant notamment l'étape d'hybridation du circuit de CdHgTe sur le substrat de lecture en silicium. Les paramètres matériaux adéquats ont également été implémentés dans le modèle. Les champs de contraintes obtenus montrent que le centre de la puce est soumis à de la traction (σ_{xx} et σ_{yy} variant de 4.6 à 8.8 MPa) alors que de la compression semble se localiser en bord de puce (σ_{xx} et σ_{yy} variant de -3.7 à -8.9 MPa). La figure 5 présente des valeurs obtenues pour σ_{yy} . Bien que les valeurs de contraintes soient moins élevées que celles obtenues en diffraction des rayons X, les résultats de la simulation montrent bien un état de compression en bordure de puce. Un affinement des paramètres matériaux ainsi que la prise en compte des orientations des monocristaux dans la simulation devraient permettre d'obtenir des valeurs plus proches de la réalité. De même, l'homogénéisation ne permet pas de comprendre certains effets géométriques sur ces champs de contraintes, à savoir les zones en contact avec les billes, zone inter-billes... Ces hypothèses sont également susceptibles d'influencer les résultats expérimentaux.

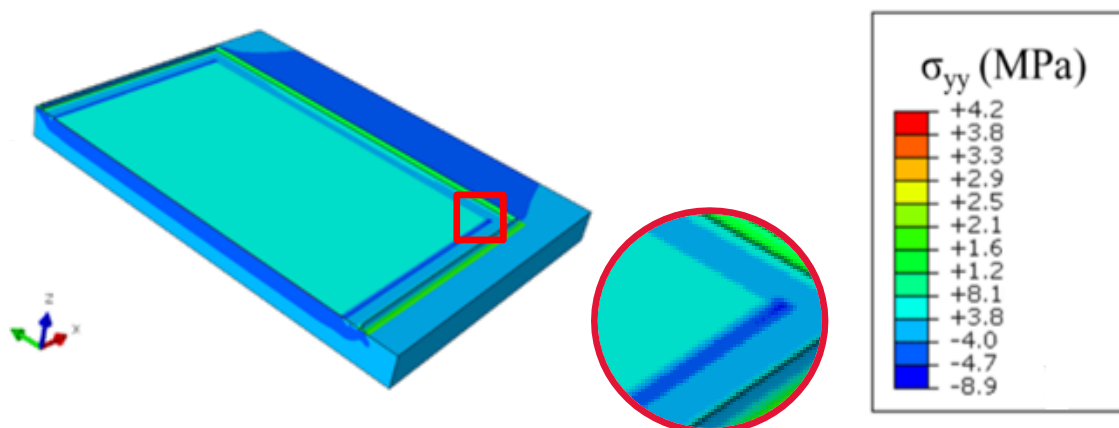


Figure 5 Champ de contraintes dans la puce de CdHgTe obtenu par simulation Eléments Finis du procédé de fabrication de l'assemblage

3 Conclusion

L'analyse par diffraction des rayons X selon la méthode monocristalline s'avère une méthode performante pour l'analyse de contrainte dans les assemblages microélectroniques (présence notamment de silicium monocristallin dans de nombreuses structures). Cette méthode a permis l'analyse d'une puce en CdHgTe brasée sur un substrat de silicium, assemblage régulièrement sujet à des problèmes de fiabilité après son processus de fabrication. Les résultats montrent des valeurs variant de -1 à -31 MPa et un état de compression biaxiale de la bordure de la puce par rapport à son centre. Cet état de contrainte peut avoir des explications diverses : application de chargements mécaniques sur l'assemblage durant sa fabrication, effets de bord dus à la géométrie de l'assemblage, excédent d'époxy en bordure... Les résultats numériques obtenus avec la modélisation EF d'un assemblage 3D montrent des tendances similaires avec des valeurs de contraintes moins élevées (maximum de -9 MPa relevé en bordure). L'analyse par DRX effectuée dans cette étude est néanmoins restreinte par la résolution de la technique. Des analyses de contrainte à une échelle plus fine permettraient de mieux comprendre le comportement de la puce en bordure. Pour cela, différentes méthodes pourront être mise en place, telle que la technique de microdiffraction Kossel [4] ou la microdiffraction Laue pouvant être réalisée à l'ESRF.

Références

- [1] T.-S. Imura, S. Weissmann and J. Slade, "A study of age-hardening of Al-3.85% Cu by the divergent X-ray beam method", *Acta Crystallographica*, vol. 15, 1962, pp. 786-793.
- [2] B. Ortner, "Simultaneous determination of the lattice constant and elastic strain in cubic single crystals by X-Ray diffraction", *Advances in X-Ray Analysis*, vol. 29, 1986, pp. 387-394.
- [3] Kpobie, W., Bonfoh, N., Dreistadt, C. Fendler, P. Lipinski, "Three dimensional thermomechanical simulation of fine-pitch high-count ball grid array flip-chip Assemblies," *Journal of Elec Materi.*, vol. 43, 2014, pp. 671-684.
- [4] R. Pesci, K. Inal, S. Berveiller, E. Patoor, J. S. Lecomte and A. Eberhardt, "Inter- and intragranular stress determination with Kossel microdiffraction in a scanning electron microscope", *Materials Science Forum*, vol. 524-525, 2006, pp. 109-114.